UDC 54 Coden: CCACAA YU ISSN 0011—1643

DOCUMENTA CHEMICA YUGOSLAVICA

CROATICA CHEMICA ACTA

Vol. 57

INDEX

ZAGREB
YUGOSLAVIA
1984

Croat. Chem. Acta CCACAA

CROATICA CHEMICA ACTA

Adresa redakcije **Address of the Editorial Board**

CROATICA CHEMICA ACTA
19 Marulićev trg, Zagreb, Croatia, Yugoslavia

REDAKCIJSKI ODBOR — EDITORIAL BOARD

Glavni urednik — Editor-in-Chief
Siniša Maričić

Pomoćni urednici — Assistant Editors
Mladen Biruš i Marijan Pribanić

Tajnik — Secretary
Dina Keglević

Pomoćni tajnik — Assistant Secretary
Vera Mikulčić

Članovi odbora — Members

M. Eckert-Maksić, B. Grabarić, L. Klasinc, Z. Konrad, Ž. Kućan, Z. B. Maksić, B. Matković, Z. Meić, I. Piljac, N. Pravdić, V. Pravdić, M. Proštenik, E. Reiner, B. Ruščić, Vl. Simeon, V. Šunjić, B. Tamhina, Đ. Težak i N. Trinajstić

REDAKCIJSKI SAVJET — ADVISORY BOARD

K. Balenović, A. Bezjak, A. Despić, Gj. Deželić, M. Deželić, I. Filipović, V. Gall, D. Grdenić, H. Iveković, B. Kamenar, O. Lahodny-Šarc, B. Lovreček, D. Maljković, P. Mildner, M. Mirnik, M. Proštenik, M. Randić, P. Strohal, D. Sunko, V. Škarić i M. Tišler

CROATICA CHEMICA ACTA 57 (1984)

CONTENTS

ORIGINAL SCIENTIFIC PAPERS

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

S. El-Basil: An Easy Combinatorial Algorithm for the Construction of Sextet Polynomials of Cata-Condensed Benzenoid Hydrocarbons 1

S. El-Basil: Molecular Topology and Molecular Properties. I. »Sequence« Labels of Cata-Condensed Benzenoid Hydrocarbons Containing up to Five Rings 21

S. El-Basil: On a Graph-Theoretical Approach to Kekulé Structures. Novel Identies of Sextet Polynomials and a Relation to Clar's Sextet Theory 47

M. Hodošček, D. Kocjan, and T. Šolmajer: *Ab Initio* MO Study of Hydrogen Bonded Complex: Noradrenaline-Formic Acid 65

M. Topić and A. Moguš-Milanković: A Multiple Thermal Analysis of Ammonium Heptamolybdate Tetrahydrate 75

A. Julg and B. Deprick: Theoretical Study of Adsorption of Carbonyl Compounds on Ionic Crystals: I. Formaldehyde, Glyoxal, *o*- and *p*-Benzoquinone on the (100) Face of Sodium Chloride 85

D. Težak, F. Strajnar, D. Šarčević, O. Milat, and M. Stubičar: Solid/Liquid Equilibria in Aqueous Systems of Dodecyl Benzene Sulphonate and Alkaline Earth Ions 93

S. K. Dua, V. Kapur, and S. K. Sahni: Titanyl(IV), Zirconyl(IV), Hafnyl(IV) and Uranyl(VI) Complexes of Terdentate Benzoyl Hydrazones . . . 109

Lj. Tušek-Božić and B. Božić: Conductance Study of Ion-Pairing of Alkali Picrate and Tetraphenylborate Complexes with Some Macrocyclic Polyethers in Methanol 119

D. D. Lasič, M. E. Marcondes Helene, L. W. Reeves, and M. Szarka: Micelle Forms in Lyotropic Nematics and Cholesterics 129

B. Kamenar, M. Penavić, and A. Hergold-Brundić: The Crystal Structure of Phenylmercury(II) Trifluoroacetate and the Refinement of the Crystal Structure of Phenylmercury(II) Acetate 145

M. Lovrić, T. Magjer, and M. Branica: Electrochemical Kinetic Measurements and Metal Speciation with the Vibrating Dropping Mercury Electrode 153

K. Kovačević, Z. B. Maksić, and A. Moguš-Milanković: Geometry of Molecules. Part 7. Interatomic Distances, Bond Angles and Strain Energies in some Rotenes and Related Spirocompounds by the IMO Method 187

M. Cvetkovska, T. Grčev, and G. Petrov: Investigations Electrochimiques des Systèmes Rédox: Fe^{3+}, Fe(III)-Complexe, Cu^{2+}, Cu(II)-Complexe-*meta*-Bisulfite de Sodium, Initiateurs de Polymérisation de l'Acrylamide en Milieu Aqueous 201

M. F. Hussain, R. K. Bansal, and B. K. Puri: Solid-liquid Separation after Liquid-liquid Extraction: Spectrophotometric Determination of Cobalt by Extraction of its 2-Methoxyethyl Xanthate in Molten Naphthalene 219

T. M. Krygowski, T. Wieckowski, and A. Sokolowska: Infrared and Raman Studies of Carbonyl Group Frequencies of *p*-Substituted Benzoic Acids in the Crystalline State 229

R. Jain: Elucidation of the Structure of Some Potential Antidiabetic Pyrazolin-5-ones Using Polarographic Technique 235

B. S. Chandravanshi and V. K. Gupta: Extraction and Spectrophotometric Determination of Cerium(IV) with *N*-*p*-Chlorophenylcinnamohydroxamic Acid 243

M. Biruš, N. Kujundžić, M. Pribanić, and Z. Tabor: Equilibrium Studies on Complexation of Iron(III) by Acet-, Glycinium and Betaine Hydroxamic Acids 313

H. Vogler: Donor-Acceptor Cyclophanes with Biradical-Ionic Ground States 325

M. Ladika, D. E. Sunko, and S. Borčić: Solvolysis Rate of 3-Methyl-2-(3--pentynyl)-2-cyclohexenyl *p*-Nitrobenzoate. A Model System for π-Participation of the CC Triple Bond 331

S. El-Basil, P. Krivka, and N. Trinajstić: Application of the Dualist Model. Generation of Kekulé Structures and Resonant Sextets of Benzenoid Hydrocarbons 339

C. Carter and J. N. Murrell: Analytical Two-valued Potential Energy Functions for the Ground State Surfaces of CO_2 ($\tilde{X}^1\Sigma_g^+$) and CS_2 ($\tilde{X}^1\Sigma_g^+$) 355

T. P. Živković: Splitting of the Configuration Interaction Space X_n into Two Complementary Subspaces 367

A. T. Balaban and I. Tomescu: Chemical Graphs. XL. Three Relations Between the Fibonacci Sequence and the Numbers of Kekulé Structures for Non-branched cata-Condensed Polycyclic Aromatic Hydrocarbons . 391

N. Bresciani-Pahor, J. D. Orbell, and L. Randaccio: Steric Influences in Octahedral Cobaloximes. The Crystal and Molecular Structure of *trans*--methylbis(dimethylglyoximato)(phosphite)cobalt-(III) Complex with Phosphite=$P(OMe)_2Ph$ and $P(OMe)Ph_2$ 433

M. J. Malinar, P. N. Radivojša, K. Marković, D. Belić, and M. B. Ćelap: Synthesis and Configuration of New Isomers of the Bis(aminocarboxylato) carbonatocobaltate(III) Ion 443

P. Radivojević, N. Milinski, B. Ribár, and D. Lazar: The Crystal Structure of the Complex$[Y(H_2O)_5(NO_3)_2][Y(H_2O)_2(NO_3)_4]$ 451

E. C. Alyea, S. A. Dias, G. Ferguson, and P. Y. Siew: Structural Studies of Steric Effects in Phosphine Complexes. Part XII. Synthesis, Characterisation, and Crystal and Molecular Structure of Bis(trifluoroacetato) (trimesitylphosphine)mercury(II) Dimer, $[Hg(CF_3CO_2)_2P(mesityl)_3]_2$ . . 457

W. H. Watson and W. W. Holley: The Structure of Four Complexes of 2,2,6,6--Tetramethyl-3,5-heptanedione Containing One, Four, Four and Nine Cu(II) Ions 467

P. Bronzan-Planinić and H. Meider: Synthesis and Characterization of Cobalt (II), Nickel(II) and Copper(II) Chloride Complexes with Bis[(diphenylphosphinyl)methyl]phenylphosphine Oxide and Bis[(diphenylphosphinyl) methy]-phosphinic Acid 477

G. B. Carpenter: The Conventional Bravais Unit Cell from Diffractometer Data 491

P. Engel and W. Nowacki: Refinement of the Crystal Structure of Synthetic Tl_3AsS_4 499

D. Doppelt, J. Fischer, and R. Weiss: Synthesis and Structure of a Dimercapto--Iron(III) Porphyrin Derivative: $|Fe(SC_6HF_4)_2TPP||Na\subset 18C6|$, C_6H_6 . 507

A. Kálmán, G. Argay, B. Ribár, S. Vladimirov, and D. Živanov-Stakić: Crystal and Molecular Structure of 3β-Hydroxy-14,15β-epoxy-5β,14β-card--20,22-enolide (Digirezigenin) 519

N. Brničević, Š. Mesarić, and H. Schäfer: Cluster Hydroxides of the Composition $M_2[Ta_6Cl_{12}](OH)_6 \cdot nH_2O$, with M=Na, K, Rb, $(CH_3)_4N^+$; and $(C_2H_5)_4N^+$; Air Oxidation of the Cluster Unit $|Ta_6Cl_{12}|^{2+}$ in Alkaline Medium 529

B. Nowitzki and R. Hoppe: Eine Bemerkung über $K_2[NiO_2]$ 537

L. P. Battaglia, A. Bonamartini Corradi, and M. Nardelli: Structural Aspects of 2-Thioimidazolidine Coordination in Silver(I) Halide Complexes . . 545

Lj. Golič, I. Leban, and P. Šegedin: Behaviour of Dimolybdenum Tetraacetate in Aqueous Solutions of Hydrogen Halides. Synthesis and Crystal Structures of $(pyH)_2[Mo_2(O_2CCH_3)_4Br_2]$ and two Modifications of $(pyH_2)[Mo_2(O_2CCH_3)_4I_2]$ (py = pyridine) 565

B. V. Prelesnik and R. M. Herak: The Crystal Structure of *trans*(NO_2, N=C—CH_3)-(*N*-ethylidene-ethylene-diamine)-glycylglycinatonitrocobalt(III) Monohydrate, $[Co(glygly)—NO_2(CH_3CH=en)]\cdot H_2O$ 577

Lj. Manojlović-Muir and K. W. Muir: A Novel Pt(II)-Pt(IV) Mixed Valence Complex: The Crystal and Molecular Structure of $[LP(\mu\text{-}I)(\mu\text{-}Me_2PCH_2PMe_2)_2]$ $PtMe_3$ $[I_3]$, L = 0.45I + 0.55Me 587

N. Galešić, B. Matković, M. Topić, E. Coffou, and M. Šljukić: The Crystal Structure of Disodium Thorium Biphosphate, $Na_2Th(PO_4)_2$ 597

M. Herceg, B. Matković, D. Sevdić, D. Matković-Čalogović, and A. Nagl: A Folded Conformation of 1,4,8,11-Tetrathiacyclotetradecane in its Mercury Compound: 1,4,8,11-Tetrathiacyclotetradecanedipicratomercury(II) Heminitromethane, $[Hg(C_{10}H_{20}S_4)\cdot(C_6H_2N_3O_7)_2]\cdot 1/2CH_3NO_2$ 609

I. Matijašić, G. D. Andreetti, P. Sgarabotto, A. Bezjak, and D. Fleš: Crystal and Molecular Structure of (S)-α-(p-Bromobenzenesulphonamido)-β-propiothiolactone 621

L. Colombo, G. Baranović, J. R. Durig, and A. E. Stanley: Polarized Infrared Spectra of Tolane Single Crystal 629

B. Kamenar, M. Penavić, and B. Markoviċ: The Crystal Structure of Pyridinium μ-salicylato-tetrachloro-μ-oxo-μ-ethoxo-dioxodimolibdate(V) 637

T. Balić-Žunić, S. Šćavničar, and Z. Grobenski: The Structure of Thorium(IV) Dititanium(IV) Oxide, $ThTi_2O_6$ 645

A. E. Elia, E. C. Lingafelter, and V. Schomaker: The Crystal Structure of (2,3,9,10-tetramethyl-1,4,8,11-tetraaza-1,3,8,10-cyclotetradecatetraene) copper(II) Tetraphenylborate 653

B. Kojić-Prodić, Ž. Ružić-Toroš, G. Snatzke, and J. J. Herak: An Absolute Configuration of (1R, 4R, 5R)-4-Methoxy-8-acetyl-7,7-dimethyl-6-thia-3,8-diazabicyclo[3.2.1.]octan-2-one, $C_{10}H_{16}N_2O_3S$ 661

M. Pušelj, Z. Ban, and A. Szitula: The Crystal Structure and Magnetic Properties of the $Cu_2MnAl_{1-x}Hg_x$ System 669

A. Demšar and P. Bukovec: Synthesis and Crystal Structure of Tetraethylammonium Di-μ-fluoro-bis-[aquadifluoro-oxovanadate(IV)] 673

J.-P. Charland and A. L. Beauchamp: Crystal Structure and Infrared Spectra of Anhydrous (Adeninato)methylmercury(II) 679

B. Korpar-Čolig, Z. Popović, and M. Sikirica: Mercuration of Some Aliphatic Aldehydes. The Crystal Structure of 2,2-Bis(chloromercuri)butyraldehyde 689

M. A. Beno, R. Sundell, and J. M. Williams: The Hydrogendifluoride Anion in an Asymmetric Crystalline Environment: The Crystal and Molecular Structure of Trithioureatellurium(II) Di(Hydrogendifluoride) 695

L. G. Kuz'mina and Y. T. Struchkov: Structural Chemistry of Organomercury Compounds. Role of Secondary Interactions 701

A. L. Mackay: Descriptors for Complex Inorganic Structures 725

R. D. Willett and U. Geiser: Structural Characteristics of $ACuCl_3$ Salts . . 737

S. Popović: Application of Bell-Shaped Functions in X-ray Diffraction Broadening Analysis 749

G. B. Deacon, A. Florenti, M. Hughes, and F. P. Larkins: An Investigation of the Acceptor Properties of Some Organomercurials by Molecular Weight Measurements and X-ray Photoelectron Spectroscopy 757

Z. S. Herman and L. Pauling: Hybrid Bond Orbitals and Bond Strength for Pentacovalent Bonding 765

W. E. Palke: On Determining Orbital Hybridization 779

G. Del Re and C. Barbier: *In Situ* Atomic Orbitals and Extended Basis Molecular Calculations 787

D. Lj. Vučković and Lj. Vujisić: Structure and Properties of Small Ring Propellanes by the IMO Method 801

K. H. Aufderheide: A Localized Atomic Orbital Description of the Rotational Barrier in Ethane 811

P. R. Surján: The Representation of the Chemical Bond in Quantum Chemical Calculations 833

E. Kapuy, Z. Csépes, and C. Kozmutza: Many-Body Perturbation Theory Based on Localized Orbitals 855

R. McWeeny: Weak Interactions Between Molecules 865

A. Garcia-Leigh and J. N. Murrell: On the Stability of BH_3 and BF_3 Adducts with BF, CO and N_2 879

M. Klessinger: Fragment Molecular Orbitals for Molecules and Interacting Systems 887

G. Náray-Szabó: Chemical Fragmentation for Molecular Orbital Calculations on Proteins 901

F. Bernardi, A. Bottoni and G. Tonachini: A Quantitative Analysis of the Role of Non-Bonded and Geminal Interactions in H_2N—X Molecules . . 911

L. S. Bartell: Do the VSEPR Points-on-a-Sphere Repulsions Simulate Quantum Interactions? 927

K. Jug: Bond Order as a Tool for Molecular Structure and Reactivity . . . 941

B. M. Gimarc: Nonbonded Bond Orders, Molecular Conformations and Relative Stabilities of Sulfur-Nitrogen Rings and Chains 955

E. Honegger, Z.-Z. Yang, and E. Heilbronner: The Equivalent Bond Orbital Model Revisited: I. Orbitals, Orbital Energies and PE Spectra of Saturated Hydrocarbons 967

J. Spanget-Larsen: Breakdown of the One-Electron Picture of Ionization for Hydrocarbon π-Systems 991

J. E. Bloor and R. E. Sherod: An Overlapping Spheres Multiple Scattering Xα Study of the Perfluoro Effect on the Ionization Potentials and Electron Transmission Spectra of Fluorosubstituted Benzenes . . . 1011

N. D. Epiotis, J. R. Larson, and H. H. Eaton: »Common Denominators« by the MOVB Method: The Structures of H_2O, H_2O_2 and their Derivatives . 1031

P. Politzer and B. A. Zilles: Some Observations Concerning Electronic Densities, Electrostatic Potential and Chemical Potential 1055

D. Hadži, M. Hodošček, D. Kocjan, T. Šolmajer, and F. Avbelj: The Molecular Electrostatic Potential as a Determinant of Receptor-Drug Recognition 1065

M. Kibler: Symmetry Adaptation and Wigner-Racah Algebras in Quantum Chemistry 1075

C. J. Ballhausen: The $E \otimes \varepsilon$ Jahn-Teller Coupling: Models and Manifestations 1097

M. L. Ellzey, Jr.: Derivation of the AOM Parametrization from the Effective Hamiltonian for Complexed Transitional Metal Ions with Application to Effectively Tetragonal Four-Coordinate Systems 1107

M. Grodzicki: The Applicability of Point-Charge Approximations to the Calculations of Molecular Expectation Values 1125

B. Galabov, B. Nikolova, and W. J. Orville-Thomas: Infrared Band Intensities Electronic Charge Distribution in Molecules and Polar Properties of Valence Bonds 1145

R. C. Haddon and H. D. Roth: Homoconjugation in Radical Cations . . . 1165

H. Vogler: A Theoretical Study of the ^{1}H-Chemical Shifts of [4n]- and [4n+2] Annulenes and their Di- and Tetraanions 1177

J. K. Burdett, S. Lee, and W. C. Sha: The Method of Moments and Energy Levels in Molecules and Solids 1193

N. Raos and Vl. Simeon: Conformational Analysis of Bis-(*N*,*N*-dimethylisoleucinato)-Copper(II): Estimation of the Diastereoselectivity Effect by Means of two Approximate Methods 1217

A. Koukoulas and M. A. Whitehead: Penetration in the CNDO Theory . . 1225

C. Trindle: The Hierarchy of Models in Chemistry 1231

B. Kirtman and W. E. Palke: Factors Governing Nucler Geometry and Bond--Orbital Directions in Second Row AH_3 Molecules 1247

D. Cremer and E. Kraka: A Description of the Chemical Bond in Terms of Local Properties of Electron Density and Energy 1259

W. L. Luken: Properties of the Fermi Hole in Molecules 1283

Z B. Maksić, M. Eckert-Maksić, and K. Rupnik: Model Description of Some Molecular Properties by the Modified-Atom-in-a-Molecule (MAM) Approach 1295

S.-K. Kang, T. A. Albright, and J. Silvestre: The Bonding of P_4 to d^8-ML_3 Complexes 1355

H. Nakatsuji and M. Hada: Interaction of the Hydrogen Molecules with the Palladium Atom. A Force Theoretic Study 1371

E. Ortoleva and M. Simonetta: A Theoretical Study of the Influence of Surface Structure on Chemosorption of Nitrogen on Iron Single-Crystal Faces 1387

M. Persico and J. Tomasi: An Evaluation of Solvent Effects on Isomerization Mechanisms in Diimide and Methylenimine 1395

G. Klopman and M. R. Frierson: The Alpha-Efect. A Theoretical Study Incorporating Solvent Effect 1411

H. O. Villar, O. G. Stradella, R. E. Cachau, and E. A. Castro: Some Comments on the Nucleation Phenomena 1417

M. V. Basilevsky, N. N. Weinberg, and M. V. Zhulin: Where is the Limit to which the Qualitative Theory of Chemical Reactivity can be Extended? Study of Dienophilic Activity of Cyanoethylenes 1423

P. N. Skancke: A Molecular-Orbital Study of the Thermal Walk Rearrangement of Bicyclo[2.1.0]pent-2-ene 1445

W.-K. Ip and W.-K. Lee: MNDO Study of the Dimerization of Borane . . 1451

F. Volatron, Y. Jean, and Nguyên. T. Anh: The Role of Lone Pairs in Heteroatomic Chemistry. Graphical Analysis and *Ab Initio* Calculations of Oxirane and Aziridine Ring Opening 1461

J. B. Moffat: Partitioning and Additivity of the Chemical Bond 1475

C. Petrongolo: Non Adiabatic Effects and Radiationless Transitions . . . 1485

A. Julg: The Problem of Enantiomers: Support for a New Interpretation of Quantum Mechanics 1497

M. Kibler and T. Négadi: On the Use of Nonbijective Canonical Transformations in Chemical Physics 1509

K. Balasubramanian: Recent Applications of Group Theoretical Generators to Chemical Physics 1525

T. P. Živković: The Splitting Theorem and Properties of Alternant Systems . 1553

T. P. Živković: Antialternant Perturbations of Alternant Systems . . . 1575

A. Graovac and O. E. Polansky: Topological Effect on Molecular Orbitals. Part 8. A Study of two Further Classes of Topologically Related Isomers 1595

L. v. Szentpály and W. C. Herndon: A Comparison of Pencil and Paper Procedures, PMO, Free Electron PMO, and Structure-Resonance Theory Calculations for Proton Affinities 1621

M. Grzonka, J. V. Knop. L. Klasinc, and N. Trinajstić: Theoretical Studies on Small Ring Heteropropellanes. Oxapropellanes 1629

T. Hirano and E. Ōsawa: On the Correspondence between Molecular Orbital Energies and Empirical Force Field Potential Terms 1633

V. Kvasnička. Second Quantization Formalism for Geminals 1643

V. Kellö, I. Hubač, A. I. Boldyrev, and V. Špirko: *Ab Initio* MBPT(4) Calculations of the Inversion Potential Function of NH_3 1661

E. W. Thulstrup: Interpretation of Optical Spectra of Partially Aligned Samples 1667

CHEMICAL SYNTHESIS

V. Šunjić, Š. Šimaga, and Lj. Vitale: The Synthesis and Angiotensin Converting Enzyme Inhibitory Activities of *N*-[(3-Substituted)aminocarbonyl] propanyl-L-prolines 251

V. Rapić and I. Habuš: Ferrocene Compounds. XII. Reactions of Ferrocenecarbaldehyde with Benzanilides and *n*-Butyllithium 265

S. Djokić, B. Gašpert, I. Lukić, Z. Mandić, B. Šimunić, M. Tomić, and A. G. Maasböl: *N*-4-Chlorobutyryl Aminoacids as a Common Intermediate in the Synthesis of *N*-Alkylamides of 2-Oxo-Pyrrolidine and L-Aspartyl--L-Phenylalanine Esters 271

M. V. Prošteník, M. Dumić, and I. Butula: Chemistry of 1,3-Dioxepins. II. Dehydrohalogenation of 5,6-Dihalogen-1,3-Dioxepanes with Strong Bases 281

M. Dumić, M. V. Prošteník, J. Fabijanić, und I. Butula: Chemie der 1,3-Dioxepine; III. Palladium-katalysierte Isomerisierung von 4,7- zu 6,7-Dihydro-1,3-dioxepinen 405

BIOCHEMISTRY

J. Kobe, Z. Crnjak Orel, and J. Kidrič: Complex Formation Between the Antiviral Nucleoside Ribavarin (1-β-D-Ribofuranosyl-1,2,4-Triazole-3-Carboxamide) and Bivalent Metal Ions: ^{1}H and ^{13}C NMR Studies, and Comparison with Inosine 165

B. Mulac-Jeričević, B. Vranešić, S. Kveder, B. Jamnicky, and D. Keglević: Crystalline Suspension of Bovine Zinc Des-AlaB30-Insulin with Prolonged Hypoglycaemic Activity 289

J. Kobe, B. Rusjakovski, and B. Brdar: The Synthesis of Antiviral Activities of 2-Substituted Azino-3-β-D-ribofuranosyl and α and β-D-arabinofuranosyl-5-carbamoylmethylenethiazolidine-4-ones 295

D. Vasić-Rački: Immobilization of Yeast Alcohol Dehydrogenase on Weakly Basic Anion Exchange Resin Beads 305

V. Škarić, M. Pavela-Vrančić, and J. Matulić-Adamić: Stereoselective Transformations in the Thymidine Series 415

J. Babnik, T. Lah, V. Cotič, and V. Turk: Anticathepsin D Antibody-Sepharose Chromatography of Human Cathepsin D 425

ANALYTICAL CHEMISTRY

V. Grdinić and M. Jakševac-Mikša: Microdetection of Some Biologically Active Thiol Compounds with Sodium Pentacyanoammineferrate(II) on Ion--Exchange Resin Grains 411

PRELIMINARY COMMUNICATIONS

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

M. Ladika and D. E. Sunko: Allylic Cations in Solvolysis. A Case of Non-Participation 179

CHEMICAL SYNTHESIS

V. Škarić and Dj. Škarić: Novel Syntheses of Thiazolo[3,2-a]pyrimidin-7-ones . 183

CROATICA CHEMICA ACTA 57 (1984)

SADRŽAJ

ORIGINALNI ZNANSTVENI RADOVI

OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

S. El-Basil: Jednostavan kombinatorni algoritam za konstrukciju sekstetnog polinoma kata-kondenziranih benzenoidnih ugljikovodika 1

S. El-Basil: Molekularna topologija i molekularna svojstva. I. Sekvencijske oznake kata-kondenziranih benzenoidnih ugljikovodika koji sadrže do pet prstenova 21

S. El-Basil: O graf-teorijskom pristupu Kekuléovim strukturama. Novi identiteti sekstetnih polinoma i veza s Clarovom teorijom seksteta . . . 47

H. Hodošček, D. Kocjan in T. Šolmajer: Študij kompleksa noradrenalin--mravlja kiselina 65

M. Topić i A. Moguš-Milanković: Višestruka termička analiza amonij heptamolibdat tetrahidrata 75

A. Julg i B. Deprick: Teorijska studija adsorpcije karbonilnih spojeva na ionskim kristalima: I. Formaldehid, glioksal, o- i p-benzokinon na (100) plohi natrij klorida 85

Đ. Težak, F. Strajnar, O. Milat, M. Stubičar i D. Šarčević: Ravnoteže čvrsto/tekuće u vodenim sustavima dodecil benzen sulfonata i zemnoalkalijskih iona 93

S. K. Dua, V. Kapur i S. K. Sahni: Titanat(IV)-, cirkonil(IV)-, hafnil(IV)-, i uranil(VI)-kompleksi terdentatnih benzoilhidrazona 109

Lj. Tušek-Božić i B. Božić: Ispitivanje vodljivosti ionskih parova kompleksa nekih makrocikličkih polietera s pikratima i tetrafenilboratima alkalnih metala u metanolu 119

D. D. Lasič, M. E. Marcondes H., L. W. Reeves i M. Szarka: Micelarni oblici kod liotropnih nematičkih i kolesterolskih tekućih kristala 129

B. Kamenar, M. Penavić i A. Hergold-Brundić: Kristalna struktura fenilživa (II)-trifluoroacetata i utočnjavanje strukture fenilživa(II)-acetata . . 145

M. Lovrić, T. Magjer i M. Branica: Elektroanalitička primjenjivost živine elektrode koja vibrira 153

K. Kovačević, Z. B. Maksić i A. Moguš-Milanković: Geometrija molekula. 7. Međuatomske udaljenosti, kutevi između veza i energije napetosti kod nekih rotena i sličnih spiro spojeva studiranih IMOA metodom . . . 187

M. Cvetkovska, T. Grčev i G. Petrov: Elektrohemijska ispitivanja redoks sistema: Fe^{3+}, Fe(III)-kompleksi, Cu^{2+}, Cu(II)-kompleksi — $Na_2S_2O_5$, za iniciranje polimerizacije akrilamida u vodenoj sredini 201

M. F. Hussain, R. K. Bansal i B. K. Puri: Spektrofotometrijsko određivanje kobalt-2-metoksietil-ksantata nakon njegove ekstrakcije u rastaljenom naftalenu i separacije čvrste i tekuće faze 219

T. M. Krygowski, T. Wieckowski i A. Sokolowska: Frekvencije karbonilne grupe u infracrvenim i Raman spektrima za p-supstituirane benzojeve kiseline u kristalnom stanju 229

R. Jain: Određivanje strukture nekih potencijalnih antidiabetskih pirazolin-5--iona pomoću polarografske metode 235

B. S. Chandravanshi i V. K. Gupta: Ekstrakcija i spektrofotometrijsko određivanje cera(IV) s *N*-p-klorofenilcinamohidroksamatnom kiselinom . . 243

M. Biruš, N. Kujundžić, M. Pribanić i Z. Tabor: Istraživanje ravnoteže pri kompleksiranju željezo(III)-iona s acet-, glicinium i betain-hidroksamatnim kiselinama 313

H. Vogler: Donor-akceptorski ciklofani s biradikalsko-ionskim osnovnim stanjima 325

M. Ladika, S. Borčić i D. E. Sunko: Brzina solvolize 3-metil-2-(3-pentinil)-2--cikloheksenil-*p*-nitrobenzoata. Modelni sistem za π-participaciju trostruke veze CC 331

S. El-Basil, P. Krivka i N. Trinajstić: Primjena dualističkog modela. Generiranje Kekuléovih struktura i rezonancijskih seksteta benzoidnih ugljikovodika 339

S. Carter i J. N. Murrell: Analitičke dvovrijednosne potencijalne energijske funkcije za površine temeljnog stanja od $CO_2(\tilde{X}^1\Sigma_g^+)$ i $CS_2(\tilde{X}^1\Sigma_g^+)$ . . 355

T. P. Živković: Cijepanje konfiguracijsko-interakcijskog prostora X_n na dva komplementarna podprostora 367

A. T. Balaban i I. Tomescu: Kemijski grafovi. 40. Tri relacije između Fibonaccijevog niza i brojeva Kekuléovih struktura za nerazgranate katakondenzirane policikličke aromatske ugljikovodike 391

N. Bresciani-Pahor, J. D. Orbell i L. Randaccio: Sterički utjecaji u oktaedarskom kobaloksimima. Kristalna i molekulska struktura *trans*-metilbis (dimetilglioksimato(fosfit)kobalt(III) kompleksa s fosfit = $P(OMe)_2Ph$ i $P(OMe)Ph_2$ 433

M. J. Malinar, P. N. Radivojša, K. Marković, D. Belić i M. B. Čelap: Sinteza i konfiguracija novih izomera bis(amino-karboksilato)-karbonato-kobalt (III) jona 443

P. Radivojević, N. Milinski, B. Ribár i D. Lazar: Kristalna struktura kompleksa $[Y(H_2O)_5(NO_3)_4]$ $[Y(H_2O)_2(NO_3)_2]$ 451

E. C. Alyea, S. A. Dias, G. Ferguson i P. Y. Siew: Strukturno proučavanje steričkih efekata u fosfinskim kompleksima. Dio XII. Sinteza, karakterizacija, te kristalna i molekularna struktura bis(trifluoroacetato)trimezitilfosfin)žive(II)-dimera $[Hg(CF_3CO_2)_2P(mezitil)_3]_2$ 457

W. H. Watson i W. W. Holley: Strukture četiri 2,2,6,6-tetrametil-3,5-heptandionova kompleksa s jednim četiri, četiri i devet Cu(II) iona . . . 467

P. Bronzan-Planinić i H. Meider: Priprava i opis kompleksa kobalt(III)-nikal (II)- i bakar(II)-klorida s bis[(difenilfosfinil)metil]fenilfosfin oksidom i bis[(difenilfosfinil)metil]-fosfinskom kiselinom 477

G. B. Carpenter: Konvencionalna Bravaisova jedinična ćelija iz difraktometrijskih podataka 491

P. Engel i W. Nowacki: Utočnjavanje kristalne strukture sintetskog Tl_3AsS_4 . 499

P. Doppelt, J. Fischer, R. Weiss: Sinteza i struktura jednog dimerkapto-željezo (III) porfirinskog derivata: $|Fe(SC_6HF_4)_2TPP||Na\subset 18C6|\cdot C_6H_6$ . . 507

A. Kálman, G. Argay, B. Ribár, S. Vladimirov i D. Živanov-Stakić: Kristalna i molekulska struktura 3β-hidroksi-14,15β-epoksi-5β,14β-kard-20,22-enolida (Digirezigenin) 519

N. Brničević, Š. Mesarić i H. Schäfer: Klasterski hidroksidi sastava $M_2[Ta_6Cl_{12}](OH)_6\cdot nH_2O$, M=Na, K, Rb, $(CH_3)_4N^+$ i $(C_2H_5)_4N^+$; Oksidacija klasterske jedinice $[Ta_6Cl_{12}]^{2+}$ kisikom iz zraka u lužnatom mediju . . 529

B. Nowitzki i R. Hoppe: Neka zapažanja o $K_2[NiO_2]$ 537

L. P. Battaglia, A. Bonamartini Corradi i I. M. Nardelli: Strukturni aspekti 2-tioimidazolidin koordinacije u srebro(I) halidnim kompleksima . . 545

Lj. Golič, I. Leban in P. Šegedin: Obnašanje dimolibdenovega tetraacetata v vodnih raztopinah vodikovih halogenidov. Sinteze in kristalne strukture $(pyH)_2[Mo_2(O_2CCH_3)_4Br_2]$ in dveh modifikacij $(pyH)_2[Mo_2(O_2CCH_3)_4I_2]$ (py=piridin) 565

B. V. Prelesnik i R. M. Herak: Kristalna struktura *trans*(NO_2, N=C—CH_3)—(*N*--etiliden-etilen-diamin)-(glicil-glicinato)-nitro-kobalt(III)monohidrata, $[Co(glygly)NO_2(CH_3CH{=}en)]\cdot H_2O$ 577

Lj. Manojlović-Muir i K. W. Muir: Novi Pt(II)—Pt(IV) kompleks miješane valencije: Kristalna i molekulska struktura $[LP(\mu\text{-}I)\ (\mu\text{-}Me_2PCH_2PMe_2)_2PtMe_3]I_3$, $L = 0{,}45I + 0{,}55Me$ 587

N. Galešić, B. Matković, M. Šljukić, M. Topić i E. Coffou: Kristalna struktura dinatrijtorijevog bifosfata, $Na_2Th(PO_4)_2$ 597

M. Herceg, B. Matković, D. Sevdić, D. Matković-Čalogović i A. Nagl: Svinuta konformacija 1,4,8,11-tetratiociklotetradekana u živinu spoju 1,4,8,11-tetratiociklotetradekandipikratoživa(II)-heminitrometan, $[Hg(C_{10}H_{20}S_4)\cdot(C_6H_2N_3O_7)_2]\cdot 1/2\ CH_3NO_2$ 609

I. Matijašić, G. D. Andreetti, P. Sgabaratto, A. Bezjak i D. Fleš: Kristalna i molekularna struktura (S)α-(p-bromobenzensulfonamido-β-propiotiolaktona 621

L. Colombo, G. Baranović, J. R. Durig i A. E. Stanley: Spektri tolana . . 629

B. Kamenar, M. Penavić i B. Marković: Kristalna struktura piridinij-μ-salicilato-tetrakloro-μ-okso-μ-etoksodioksodimolibdata(V) 637

T. Balić Žunić, S. Šćavničar i Z. Grobenski: Struktura $ThTi_2O_6$ 645

A. E. Elia, E. C. Lingafelter i V. Schomaker: Kristalna struktura (2,3,9,10-tetrametil-1,4,8,11-tetraaza-1,3,8,10-ciklotetradekatetraen)bakar(II)-tetrafenilborata 653

B. Kojić-Prodić, Ž. Ružić-Toroš, G. Snatzke i J. J. Herak: Apsolutna konfiguracija (1R, 4R, 5R)-4-metoksi-8-acetil-7,7-dimetil-tio-3,8-diazabiciklo [3.2.1]-oktan-2-ona, $C_{10}H_{16}N_2O_3S$ 661

M. Pušelj, Z. Ban i A. Szitula: Kristalna struktura i magnetska svojstva sistema $Cu_2MnAl_{1-x}Hg_x$ 669

A. Demšar i P. Bukovec: Sinteza in kristalna struktura tetraetilamonijevega di-μ-fluoro-bis[akvadifluorooxovanadat(IV)] 673

J.-P. Charland i A. L. Beauchamp: Kristalna struktura i infracrveni spektri bezvodne (adeninato)metilžive(II) 679

B. Korpar-Čolig, Z. Popović i M. Sikirica: Merkuriranje nekih alifatskih aldehida. Kristalna struktura 2,2-bis(kloromerkuri)butiraldehida 689

M. A. Beno, R. Sundell i J. M. Williams: Anion vodikovog diflorida u asimetričnom kristalnom okruženju: kristalna i molekularna struktura tritioureatelur(II) di(hidrogendiflorida) 695

L. G. Kuz'mina i Y. T. Struchkov: Strukturna kemija organoživinih spojeva. Uloga sekundarnih interakcija 701

A. L. Mackay: Deskriptori za kompleksne anorganske strukture 725

R. D. Willett i U. Geiser: Strukturne karakteristike $ACuCl_3$ soli 737

S. Popović: Primjena zvonolikih funkcija u analizi rendgenskoga difrakcijskog proširenja 749

G. B. Deacon, A. Florenti, M. Hughes i F. Larkins: Istraživanje akceptorskih svojstava nekih organomerkurijala mjerenjem molekulske težine i rendgenskom fotoelektronskom spektroskopijom 757

Z. S. Herman i L. Pauling: Hibridne orbitale i jačina pentakovalentnog vezanja 765

W. E. Palke: O određivanju hibridizacije orbitala 779

G. Del Re i C. Barbier: Atomske orbitale *in situ* i molekularni računi s proširenim skupovima osnovnih funkcija 787

D. Lj. Vučković i Lj. Vujisić: Strukturni parametri i svojstva malih propelana dobiveni primjenom IMO metode 801

K. H. Aufderheide: Opis rotacijske barijere etana s pomoću lokaliziranih atomskih obitala 811

P. R. Surján: Opis kemijske veze u kvantnoj kemiji 833

E. Kapuy, Z. Csépes i C. Kozmutza: Perturbacijska teorija više tijela uporabom lokaliziranih orbitala 855

R. McWeeny: Slabe interakcije između molekula 865

A. Garcia-Leigh i J. N. Murrell: O stabilnosti adukata BH_3 i BF_3 s dvoatomskim molekulama BF, CO i N_2 879

M. Klessinger: Opis molekula i njihovih međudjelovanja s pomoću molekulskih orbitala njihovih fragmenata 887

G. Náray-Szabó: Molekulsko-orbitalni računi na proteinima primjenom postupka kemijske fragmentacije 901

F. Bernardi, A. Bottoni i G. Tonachini: Kvantitativna analiza uloge neveznih i geminalnih interakcija kod molekula $H_2N—X$ 911

L. S. Bartell: Da li odbijanje VSEPR »točaka-na-kugli« simulira kvantne interakcije? 927

K. Jug: Red veze kao pribor za proučavanje molekulskih struktura i reaktivnosti 941

B. M. Gimarc: Nevezni redovi veza, konformacije molekula i relativne stabilnosti S—N prstena i lanaca 955

E. Honegger, Z.-z. Yang i E. Heilbronner: Preispitivanje modela ekvivalentnih veznih orbitala: I. Orbitale, orbitalne energije i PE spektri zasićenih ugljikovodika 967

J. Spanget-Larsen: Slom jednoelektronske orbitalne slike kod ionizacije π-elektronskih ugljikovodika 991

J. E. Bloor i R. E. Sherrod: Studij utjecaja perfluoroefekta na ionizacijske potencijale i elektronske transmisijske spektre fluorsupstituiranih benzena s pomoću Xα-metode višestrukog raspršenja u aproksimaciji prekrivanja atomskih kugli (OSMS-Xα) 1011

N. D. Epiotis, J. R. Larsen i H. H. Eaton: Metoda »zajedničkih nazivnika« s pomoću MOVB pristupa: Struktura molekula H_2O, H_2O_2 i njihovih derivata 1031

P. Politzer i B. A. Zilles: Neka zapažanja u vezi elektronskih gustoća, elektrostatskih potencijala i kemijskih potencijala 1055

D. Hadži, M. Hodošček, D. Kocjan, T. Šolmajer i F. Avbelj: Molekulski elektrostatski potencijal kao odlučujući faktor u određivanju prepoznavanja receptora i lijeka 1065

M. Kibler: Simetrijska adaptacija i Wigner-Racahove algebre u kvantnoj kemiji 1075

C. J. Ballhausen: $E \otimes \varepsilon$ Jahn-Tellerovo sprezanje: Modeli i manifestacije . . 1097

M. L. Ellzey, Jr.: Izvod AOM parametrizacije iz efektivnog hamiltonijana za komplekse iona prijelaznih metala s primjenom na tetragonalne sustave koordinacije četiri 1107

M. Grodzicki: Primjenljivost aproksimacije točkastog naboja pri računanju očekivanih vrijednosti za molekule 1125

B. Galabov, B. Nikolova i W. J. Orville-Thomas: Intenziteti infracrvenih vrpci, raspodjela naboja u molekulama i polarna svojstva kovalentnih veza . 1145

R. C. Haddon i H. D. Roth: Homokonjugacija kod radikal-kationskih sustava . 1165

H. Vogler: Teorijski studij kemijskih pomaka protona kod [4*n*]- i [4*n*+2]-anulena i njihovih di- i tetraaniona 1177

J. K. Burdett, S. Lee i W. C. Sha: Metoda momenata i energijske razine molekula i čvrstih tijela 1193

N. Raos i Vl. Simeon: Konformacijska analiza kompleksa bis-(*N*,*N*-dimetilisoleucinato)-Cu(II): određivanje dijastereoselektivnog efekta s pomoću dvije aproksimativne metode 1217

A. Koukoulas i M. A. Whitehead: Integrali prodiranja u CNDO teoriji . . 1225

C. Trindle: Hijerarhija modela u kemiji 1231

B. Kirtman i W. E. Palke: O faktorima koji određuju geometrijske rasporede jezgri molekula AH_2 i smjerove lokaliziranih veznih orbitala . . . 1247

D. Cremer i E. Kraka: Opis kemijske veze s pomoću lokalnih svojstava elektronske gustoće i energije 1259

W. L. Luken: Svojstva Fermijeve šupljine u molekulama 1283

Z. B. Maksić, M. Eckert-Maksić i K. Rupnik: Opis molekulskih svojstava pomoću modela modificiranih atoma (MAM) 1295

S.-K. Kang, T. A. Albright i J. Silvestre: Vezanje P_4 na d^8-ML_3 kompleksima 1355

H. Nakatsuji i M. Hada: Interakcija molekule H_2 s atomom paladija primjenom koncepta Hellman-Feynmanove sile 1371

E. Ortoleva i M. Simonetta: Teorijsko razmatranje utjecaja strukture površina na kemosorpciju dušika na monokristale atoma željeza 1387

M. Persico i J. Tomasi: Procjena utjecaja otapala na mehanizme izomerizacije diimida i metilenimina 1395

G. Klopman i M. R. Frierson: Alfa-efekt. Teorijski studij s pomoću MINDO/3 metode i teorije solvatacije 1411

H. O. Villar, O. R. Stradella, R. E. Cachau i E. A. Castro: O pojavi nukleacije molekula 1417

M. V. Basilevsky, N. N. Weinberg i V. M. Zhulin: Do koje se granice može proširiti kvalitativna teorija kemijske reaktivnosti? Studij dienofilne aktivnosti cijanoetilena 1423

P. N. Skancke: Teorijski MO studij preuređenja biciklo[2.1.0]pent-2-ena putem termičkog koraka 1445

W.-K. Ip i W.-K. Li: Studij dimerizacije borana s pomoću MNDO metode . 1451

F. Volatron, Y. Jean i Nguyên T. Anh: Uloga osamljenih parova kod heteroatomskih molekula. Analiza otvaranja oksiranskih i aziridinskih prstena s pomoću *ab initio* računa i grafova prekrivanja 1461

J. B. Moffat: Particija i aditivnost kemijske veze 1475

C. Petrongolo: Neadijabatski efekti i prijelazi bez zračenja 1485

A. Julg: Problem enantiomera: Potpora za novu interpretaciju kvantne mehanike 1497

M. Kibler i T. Négadi: Primjena nonbijektivnih kanonskih transformacija u kemijskoj fizici 1509

K. Balasubramanian: Neke primjene teorije grupa u kemijskoj fizici . . . 1525

T. P. Živković: Teorem cijepanja i svojstva alternantnih sistema 1553

T. P. Živković: Antialternantne perturbacije alternantnih sistema 1575

A. Graovac i O. E. Polansky: Topološki efekt na molekularne orbitale. Dio 8. Studij dviju daljnjih klasa topološki vezanih izomera 1595

L. v. Szentpály i W. C. Herndon: Protonski afiniteti elektronskih molekula. Usporedba rezultata dobivenh s pomoću metoda PMO, FE-PMO i SR . 1621

M. Grzonka, J. V. Knop, L. Klasinc i N. Trinajstić: Teorijski studij molekula heteropropelana. Oksapropelani 1629

T. Hirano i E. Ōsawa: O povezanosti energija molekulskih orbitala i članova empirijskoga potencijalnog polja 1633

V. Kvasnička: Formalizam druge kvantizacije za spregnute antisimetrične dvočestične valne funkcije (geminals) 1643

V. Kellö, I. Hubač, A. I. Boldyrev i V. Špirko: *Ab initio* MBPT(4) računi potencijala inverzije NH_3 molekule 1661

E. W. Thulstrup: Interpretacija optičkih spektara djelomično uređenih uzoraka 1667

KEMIJSKA SINTEZA

V. Šunjić, Š. Šimaga i Lj. Vitale: Sinteza derivata *N*-[(3-supstituiranih)aminokarbonil]propanoil-L-prolina i njihovo djelovanje na enzim za pretvorbu angiotenzina 251

V. Rapić i I. Habuš: Reakcije ferocenkarbaldehida, benzanilida i *n*-butil-litija 265

S. Djokić, B. Gašpert, I. Lukić, Z. Mandić, B. Šimunić, M. Tomić i A. G. Maasböl: *N*-4-klorbutiril aminokiseline kao intermedijeri u sintezi *N*-alkilamida 2-oxo-pirolidina i estera-L-fenilalanina 271

M. V. Proštenik, M. Dumić i I. Butula: Kemija 1,3-dioksepina. II. Dehidrohalogeniranje 5,6-dihalogen-1,3-dioksepana s jakim bazama 281

M. Dumić, M. V. Proštenik, J. Fabijanić i I. Butula: Kemija 1,3-dioksepina. III. Izomerizacija 4,7- u 6,7-dihidro-dioksepine na katalizatorima paladija 405

BIOKEMIJA

J. Kobe, Z. Crnjak Orel i J. Kidrič: Kompleksi antivirusnega nukleozida ribavarina (1-β-D-ribofuranozil-1,2,4-triazol-3-karboksamid) z dvovalentnimi kovinskimi ioni: ^{1}H in ^{13}C NMR studja in primjerava z inozinom . . 165

B. Mulac-Jeričević, B. Vranešić, S. Kveder, B. Jamnicky i D. Keglević: Kristalna suspenzija goveđeg cink des-Ala-B30-insulina sa produženom hipoglikemičkom aktivnošću 289

J. Kobe, B. Rusjakovski in B. Brdar: Sinteza in antivirusna aktivnost 2-substituiranih azino-β-D-ribofuranozil in α in β-D-arabinofuranozil-5-karbamoilmetilentiazolidin-4-onov 295

Đ. Vasić-Rački: Imobilizacija alkoholne dihidrogenaze kvasca na slabobazičan anionski izmjenjivač 305

V. Škarić, M. Pavela-Vrančić i J. Matulić-Adamić: Stereoselektivne transformacije timidina 415

J. Babnik, T. Lah, C. Cotič i V. Turk: Immunoafinitetna kromatografija humanog katepsina D 425

ANALITIČKA KEMIJA

V. Grdinić i M. Pakševac-Mikša: Mikrodokazivanje nekih bioloških aktivnih tiola s natrij-pentacijanoaminoferatom(II) na zrncima ionsko-izmjenjivačke smole 411

PRETHODNA SAOPĆENJA

OPĆA I TEORIJSKA KEMIJA

M. Ladika i D. E. Sunko: Alilni kationi u solvolizi. Primjer izostanka partipacije 179

KEMIJSKA SINTEZA

V. Škarić i Đ. Škarić: Nova sinteza tiazolo[3,2-a]pirimidin-7-ona 183